

[総説] 確率教材としてのパーコレーションの概要

梅野 善雄*

Summary of a Percolation as Probability Teaching Materials

Yoshio UMENO*

Abstract: We connect lattice points with constant probability p . When the probability exceeds a certain value, the connection suddenly becomes infinite. It is called a percolation phase transition. When a material undergoing a phase transition is considered near the transition point, various physical quantities change according to a power law. The power law power exponents satisfies certain equations, and those same equations is expected to hold for percolation phase transitions. In this paper, we present an overview of the above, and at the same time, we also discuss some examples that can be used to present this problem to students.

Keywords: percolation, probability, phase transition, critical phenomena

1 はじめに

パーコレーションは、多数の種類がある相転移の一つのクラスであり、いろいろなものの広がり方を表わす数学モデルである。感染症の拡大、森林火災、多孔性の物質への浸透の仕方、神経細胞の情報伝達等、多方面に当てはまる事象がある。数学的には、格子点を一定の確率 p で次々に繋ぐとき、原点が無限個の格子点と繋がるような p について考えることになる。確率 p が小さいと無限に繋がることはないが、ある値を超えると突然無限に繋がるようになる。一つの値を境に状況が一変するので、パーコレーション相転移と呼ばれる(3節)。

実世界における相転移の例としては、水が温度により氷や蒸気になる、磁石に熱を加えていくと突然磁性を失う、金属を冷やしていくと突然電気抵抗が0になる、等々の多数の例がある。そして、ある種の相転移の臨界点の近傍では、いろいろな物理量が臨界点との距離に関してべき乗則で変化し、発散などの異常な変化を示す。しかも、物質の違いを超えて、べき指数の間には一定の関係式が成り立つと予想されている(2節)。

さらに、同じ関係式が、パーコレーション相転移でも成り立つと予想されている。劇的に変化する箇所の近傍で共通の関係式が成り立つというのは驚くべき事である。

本稿では、以上の概要を紹介すると同時に、パーコレーションの問題を学生にも提示可能と思われる幾つかの例について考察する。

* 一関工業高等専門学校 名誉教授 E-mail: umenoy@yunavi.lsv.jp
National Institute of Technology, Ichinoseki College, Professor Emeritus

2 相転移・臨界現象・スケーリング則

相転移現象の概要を, [1][2] をもとに紹介する.

2.1 相転移と臨界現象

相転移現象に関わるいろいろな物理量 $F(T)$ を考えると, 臨界点 T_c の近傍での挙動は, 臨界点との距離のべき乗 $|T - T_c|^a$ を含む $F(T) = C|T - T_c|^a L(T - T_c)$ (C は正の定数) の形の式で表わされる. ここで, $L(T - T_c)$ は,

$$\lim_{T \rightarrow T_c} \frac{L(\lambda(T - T_c))}{L(T - T_c)} = 1 \quad (\lambda > 0) \quad (2.1)$$

を満たす関数であり, λ は任意の正数である. このような性質をもつ関数は緩慢変動関数 (slowly varying function) と呼ばれている.

このとき, $T = T_c$ の近傍での $L(T - T_c)$ の変動は極めて遅いので, $F(T)$ の $T = T_c$ の近傍での挙動は $|T - T_c|^a$ に支配される. したがって, $F(T) \propto |T - T_c|^a$ とみることができ. 以後に現れる比例記号 \propto は, 定数の他に緩慢変動関数も含むものとする. 緩慢変動関数の例としては, 定数関数や対数関数 $\ln T$ がある. $\ln T$ は, $T_c = +0, \infty$ のとき式 (2.1) を満たしている.

相転移には, 不連続相転移と連続相転移がある. 水の相転移は不連続相転移である. それは, 融解や蒸発のとき外部との熱交換 (潜熱) が生じて, エントロピーが不連続に変化するからである. それに対して, 磁性や導電性に関する相転移は連続相転移である. エントロピーは連続的に変化しても, いろいろな量が相転移の臨界点との距離に関してべき乗則で変化し, 臨界点では発散するなどの異常な変化をする. その変化は臨界現象と呼ばれる.

磁石に熱を加えると磁力が失われる現象で, 臨界点の温度を T_c とする. 磁石の場合の物理量として, 磁化率 χ , 比熱 C , 自発磁化 m , 外部磁場 h , 相関距離 ξ , そして相関関数 $G(r)$ を考えると, 臨界点の近傍では, いずれも $|T - T_c|$ のべき乗と次のような比例関係にある. べき指数 $\alpha, \beta, \gamma, \dots$ は, 臨界指数と呼ばれる. d は空間次元である.

$$\begin{aligned} \chi &\propto \begin{cases} (T - T_c)^{-\gamma} & (T > T_c) \\ (T_c - T)^{-\gamma'} & (T < T_c) \end{cases} & C &\propto \begin{cases} (T - T_c)^{-\alpha} & (T > T_c) \\ (T_c - T)^{-\alpha'} & (T < T_c) \end{cases} \\ m &\propto (T_c - T)^\beta & (T < T_c) & m &\propto |h|^{\frac{1}{\delta}} & (T = T_c) \\ \xi &\propto \begin{cases} (T - T_c)^{-\nu} & (T > T_c) \\ (T_c - T)^{-\nu'} & (T < T_c) \end{cases} & G(r) &\propto \begin{cases} r^{-\tau} e^{-\frac{r}{\xi}} & (T \neq T_c) \\ r^{2-d-\eta} & (T = T_c) \end{cases} \end{aligned} \quad (2.2)$$

臨界点の前後の指数は ' をつけて区別したが, 実際には一致すると予想されている.

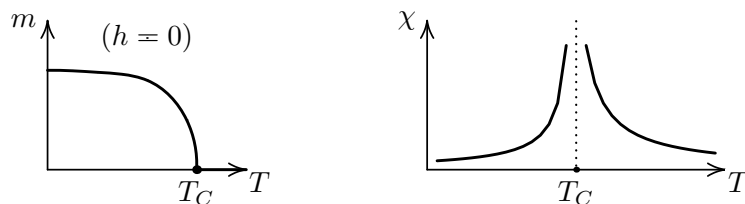


図 1: 自発磁化 m と磁化率 χ の変化

図1の左図は、臨界点では、 $h = 0$ のとき自発磁化 m が消失することを、右図は磁化率 χ が発散することを示している。比熱 C や相関距離 ξ も同様に発散する。

2.2 普遍性クラスとスケーリング則

連続相転移する物質には多種多様なものがある。例えば、いろいろな合金や高分子化合物、身近なものでは寒天やバター等の脂質などがある。そして、連続相転移をするどのような物質でも、磁石の場合の量に対応する量、たとえば液相・気相の相転移では、磁化は密度、磁化率は圧縮率で考えると、臨界点の近傍ではべき乗則に従って発散するなどの異常な変化を生じる。

さらに、いろいろな物質の臨界指数を調べると、その値は幾つかのパターンに分類することができる。その分類は臨界指数が同じような値をとる物質や系をグループ化したものであり、普遍性(ユニバーサル)クラスと呼ばれる。同じクラスに属する物質や系の相転移は同じ仕組みで生じると考えられている。普遍性クラスは数十種類以上あるといわれているが、代表的なクラスとして次のようなものがある [3]。

表1：代表的な普遍性クラスと幾つかの臨界指数

クラス名	α	β	γ	δ
平均場理論	0	$\frac{1}{2}$	1	3
3次元ハイゼンベルク	-0.12	0.366	1.395	
3次元XY	-0.015	0.349	1.318	4.780
3次元イジング	0.110	0.326	1.237	4.789
2次元イジング	0	$\frac{1}{8}$	$\frac{7}{4}$	15
2次元パーコレーション	$-\frac{2}{3}$	$\frac{5}{36}$	$\frac{43}{18}$	$\frac{91}{5}$

そして、どのクラスの臨界指数も、幾つかの共通する関係式を満たすと予想されている。たとえば、臨界指数 $\alpha, \beta, \gamma, \delta$ の間には、相転移をする物質の違いを超えて

$$2 - \alpha = \beta(\delta + 1) = \gamma + 2\beta \quad (2.3)$$

が成り立つと予想されている。実際、表1では、どのクラスもこの式を満たしている。他にも幾つかの式がある。臨界指数の間に成り立つ関係式はスケーリング則と呼ばれている。

スケーリング則は、物質の性質が劇的に変化する連続相転移の臨界点の近傍では、物質の違いを超えて共通の関係が成り立つことを示しており、これは驚くべきことである。物理学の重要課題として研究が進められている。特に、磁性体の属する普遍性クラスはイジングモデルと呼ばれており、いろいろと理論的な考察が進められている [4]。

3 パーコレーションと臨界現象

3.1 パーコレーションの概要

パーコレーションは相転移の普遍性クラスの一つであり、確率論の中で理論的な考察をすることができる。ここでは、2次元パーコレーションについて概観する。

座標平面で座標が整数の格子点を考え、その格子点を一定の確率 p で占有する。そして、占有格子点を次々に繋いでいくとき、それが無限に繋がるのは p がどのような値のときであ

るかを考える。格子点をサイト、隣り合う格子点を結ぶ辺をボンドといい、占有された格子点を考えるときはサイトパーコレーション、隣り合う格子点を確率 p で辺で結び、辺が無限に繋がる場合を考えるときはボンドパーコレーションという。

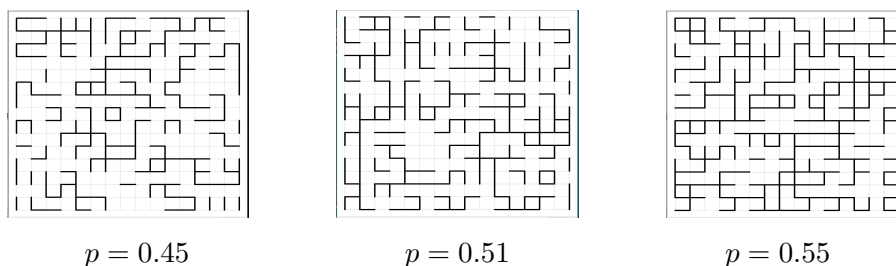


図 2: 15×15 格子の場合のボンドパーコレーションの一例

図 2 は、 15×15 の正方格子で考えたボンドパーコレーションである。この図は、[5] を利用して作成した。なお、確率を指定しても乱数を利用しているため、表示させるたびに異なる図が得られる。

繋がっている辺の集合をクラスターという。図 2 では、 $p = 0.45$ のときは端から端まで繋がるクラスターはない。 $p = 0.51$ のときは左側に下から上まで繋がるクラスターがある。 $p = 0.55$ のときは下から上、左から右に繋がるクラスターがある。格子数が少ないので $p = 0.45$ のときも繋がる場合が出てくるが、ここでは概念的な場合として述べた。

一般には任意次元 d の格子点で考え、確率 p がどのような値のときに原点を含むクラスターが無限に繋がるかを考える。具体的には、原点と繋がる格子点の数を s とするとき、 $s = \infty$ となる確率を $P(s = \infty)$ とし、各確率 p に対して

$$\theta(p) = P(s = \infty)$$

となる関数を考える。 $s < \infty$ となる p に対しては $\theta(p) = 0$ であり、 $s = \infty$ となる p に対しては $\theta(p) > 0$ である。

平面の場合は、 $p \leq \frac{1}{2}$ では $\theta(p) = 0$ であるが、 $p > \frac{1}{2}$ では $\theta(p) > 0$ であることが証明されている [6, §2]。

つまり、平面の場合は、 $p > \frac{1}{2}$ のときに原点が突然無限に繋がるようになる。 $p_c = \frac{1}{2}$ を境に状況が一変するので、パーコレーション相転移といわれる。 $\theta(p)$ をパーコレーション確率、 p_c を臨界確率という。 p_c の値は次元 d に依存するが、 d が十分に大きいときは、 $p_c \approx \frac{1}{2d}$ であることが分かっている。

次の小節で紹介するが、臨界点 p_c の近傍ではいろいろな関数が臨界点との距離に関してべき乗則にしたがって変化し、そのべき指数は相転移の場合と同じ関係式 (2.3) を満たすと予想されている。

3.2 パーコレーションの数学的な取り扱い

パーコレーションの数学的な取り扱いは、確率論の専門分野の話になる。以下では、平面のボンドパーコレーションに限定して、[6][7] をもとに議論の導入部分を概観する。

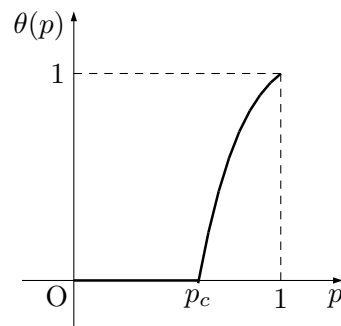


図 3: パーコレーションの臨界確率 (一般次元の場合)

■問題の設定

今、 \mathbb{Z} を整数の集合とし、座標平面で座標が整数からなる点の集合

$$\mathbb{Z}^2 = \{(m, n) \mid m, n \in \mathbb{Z}\}$$

を考え、 \mathbb{Z}^2 の要素を単に x, y などと表わす。

\mathbb{Z}^2 では、隣り合う点は格子点の前後左右の4つの点である。 $x, y \in \mathbb{Z}^2$ のとき、2点間の距離を $|x - y|$ とすると、点 x と隣り合う点 y は $|x - y| = 1$ を満たす。そこで、 $|x - y| = 1$ を満たす2点 x, y の組 (x, y) で x, y を結ぶ辺を表わすことにすると、全ての辺の集合は

$$\mathbb{B}^2 = \{(x, y) \mid |x - y| = 1, x, y \in \mathbb{Z}^2\}$$

と表わされる。

ボンドパーコレーションでは、確率 p で「辺が開いている」(または通行可)、確率 $1 - p$ で「辺が閉じている」(または通行不可)とし、開いているボンドには1を、閉じているボンドには0を対応させる。この対応を ω とし、辺 $b \in \mathbb{B}^2$ が開いているときは $\omega_b = 1$ 、閉じているときは $\omega_b = 0$ と表わす。つまり、 ω は「 $\omega: \mathbb{B}^2 \rightarrow \{0, 1\}$ 」である。

辺 b が開いているかどうかは p に依存するので、確率が p のときを考えるときは P_p で表わすことにすると、 $b \in \mathbb{B}^2$ のときは $P_p(\omega_b = 1) = p$ である。開いている辺の集合は

$$\omega^{-1}(1) = \{b \in \mathbb{B}^2 \mid \omega_b = 1\}$$

で表わされる。

2つの点 $x, y \in \mathbb{Z}^2$ が繋がっているのは、 $x = y$ である場合か、あるいは x からの開いた辺を繋いでいくと点 y に至るまでの経路が $\omega^{-1}(1)$ の中に存在する場合とし、 $x \overset{\omega}{\longleftrightarrow} y$ と表わすことにする。これは、 $\omega^{-1}(1)$ の連結成分を考えることになる。漠然と考えても考えにくいので、原点 O を含むものと考え、原点 O と繋がっている点 $y \in \mathbb{Z}^2$ の集合を

$$C_0 = \{y \in \mathbb{Z}^2 \mid O \overset{\omega}{\longleftrightarrow} y\}$$

とおき、原点 O のクラスターという。 C_0 に含まれる点の数(サイズ)を $|C_0|$ で表わし、 $|C_0| = \infty$ となる場合は無限クラスターという。

■パーコレーションで現れる関数

パーコレーションで問題とするのは、 $|C_0| = \infty$ となるクラスターの存在、それが存在するようになる臨界点 p_c の値、そして臨界点の近傍では何がどのような変化をしているか、ということである。それらを調べるために、次のような関数を考える [6, §3].

(1) 原点 O のクラスター C_0 に対して、パーコレーション確率

$$\theta(p) = P_p(|C_0| = \infty)$$

を考える。

(2) $P_p(|C_0| = n)$ をサイズ n に関して基準化して、

$$f(p) = \sum_{n=1}^{\infty} \frac{1}{n} P_p(|C_0| = n)$$

となる関数を考える．この関数は，自由エネルギーと呼ばれる．

(3) $|C_0|$ の平均は

$$\chi(p) = E_p(|C_0|)$$

で表わされる．平均クラスターサイズという． $|C_0| < \infty$ の場合について平均をとるときは， $\chi'(p) = E_p(|C_0|; |C_0| < \infty)$ で表わす．

(4) 任意に選んだ点 $x \in \mathbb{Z}^2$ が原点と繋がっている確率，つまり $x \in C_0$ となる確率を

$$\tau_p(x) = P_p(x \in C_0)$$

で表わし，2点関数または連結度関数という．

(5) 臨界点 p_c における状況として，次のことを考える必要もある．

- クラスターのサイズ分布： $P_{p_c}(|C_0| = n)$ ($n = 1, 2, \dots$)
- 臨界点上での連結度関数の値： $\tau_{p_c}(x)$ ($x \in \mathbb{Z}^2$)

(6) 原点が，どこまで離れた点と繋がっているかが重要である．次の関数を相関距離という．

$$\xi(p) = \sqrt{\frac{1}{\chi(p)} \sum_{x \in \mathbb{Z}^2} |x|^2 \tau_p(x)}$$

$|C_0| < \infty$ の場合を考えて $\chi'(p)$ を利用したときは， $\xi'(p)$ で表わす．

(7) (2) の $f(p)$ を拡張して， $h \geq 0$ に対して

$$f(p, h) = h + \sum_{n=1}^{\infty} \frac{1}{n} e^{-nh} P_p(|C_0| = n)$$

を考えると，幾つかの関数は $f(p, h)$ の偏導関数として表すことができる [7, 3 節]．
実際，単純に h で偏微分して $h = 0$ の場合を考えると

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial h} f(p, 0) &= 1 - \sum_{n=1}^{\infty} P_p(|C_0| = n) = \theta(p) \\ \frac{\partial^2}{\partial h^2} f(p, 0) &= \sum_{n=1}^{\infty} n P_p(|C_0| = n) = \chi'(p) \end{aligned} \tag{3.1}$$

が得られる． $f(p, h)$ は，熱力学の自由エネルギーと類似の振る舞いをする．

これらの関数を利用すると， C_0 が無限クラスターであることは，次のいずれかが成り立つ場合である [6, §2]．

$$\chi(p) = \infty, \quad \theta(p) > 0, \quad \inf_{x \in \mathbb{Z}^2} \tau_p(x) > 0 \tag{3.2}$$

したがって，無限クラスターが存在するような値として，次の3つの値が考えられる．

$$p_1 = \sup_{p \in [0, 1]} \{\chi(p) < \infty\}, \quad p_2 = \sup_{p \in [0, 1]} \{\theta(p) = 0\}, \quad p_3 = \sup_{p \in [0, 1]} \left\{ \inf_{x \in \mathbb{Z}^2} \tau_p(x) = 0 \right\}$$

これらの値については， $p_1 = p_2 = p_3$ であることが一般次元で証明されている [6, §2]．
したがって，臨界点は1つだけであり，その値を p_c で表わす．

■臨界点付近の挙動と臨界指数

臨界点 p_c を過ぎると、無限クラスターの生成確率が一気に正になる。この臨界点の近傍では、これまでに紹介したいろいろな関数が臨界点との距離に関してべき乗則で変化し、その臨界指数は相転移の場合と同様の関係を満たすと予想されている。具体的には、次の表1のような関係式を満たすと予想されている [6, §3].

なお、比例の記号 \propto は 2.1 節と同様の意味とする。最後の式の d は空間次元である。

表 1: 臨界指数と関係式

臨界指数	関係式
α	$\frac{d^3}{dp^3} f(p) \propto \begin{cases} (p_c - p)^{-1-\alpha} & (p \uparrow p_c) \\ (p - p_c)^{-1-\alpha'} & (p \downarrow p_c) \end{cases}$
β	$\theta(p) \propto (p - p_c)^\beta \quad (p \downarrow p_c)$
γ	$\begin{cases} \chi(p) \propto (p_c - p)^{-\gamma} & (p \uparrow p_c) \\ \chi'(p) \propto (p - p_c)^{-\gamma'} & (p \downarrow p_c) \end{cases}$
ν	$\begin{cases} \xi(p) \propto (p_c - p)^{-\nu} & (p \uparrow p_c) \\ \xi'(p) \propto (p - p_c)^{-\nu'} & (p \downarrow p_c) \end{cases}$
δ	$P_{p_c}(C_0 = n) \propto n^{-1-\frac{1}{\delta}} \quad (n \rightarrow \infty)$
η	$\tau_{p_c}(x) \propto x ^{2-d-\eta} \quad (x \rightarrow \infty)$

(注) $p \uparrow p_c$ は $p \rightarrow p_c - 0$ を, $p \downarrow p_c$ は $p \rightarrow p_c + 0$ を表わす。

これらの臨界指数の間には、式 (2.3) で示した相転移のスケーリング則と同じ関係式

$$2 - \alpha = \beta(\delta + 1) = \gamma + 2\beta$$

が成り立つことが予想されている [6, 式 (3)]. 平面の場合は、もし δ, ν が存在すれば他の臨界指数も存在して、次の式が成り立つことが証明されている [6, 定理 4].

$$\beta = \frac{2\nu}{\delta + 1}, \quad \gamma = 2\nu \frac{\delta - 1}{\delta + 1}, \quad \eta = \frac{4}{\delta + 1}$$

この関係から、 α に関する部分を除けば、式 (2.3) が満たされていることが分かる。

このように、パーコレーションの臨界点の近傍では、幾つかの関数が相転移の臨界現象と同様の現象を示し、その臨界指数はスケーリング則と同じ関係式を満たすと予想されている。パーコレーションが「相転移の数学モデル」といわれる由縁である。

なお、数学におけるパーコレーション研究の最新の成果は、[8][9] を参照されたい。

4 パーコレーションの教材

パーコレーションは、ある値を境に状況が一変する連続相転移の普遍性クラスの一つである。臨界点の近傍では、いろいろな関数が臨界点との距離に関してべき乗則に従って変化

し、その臨界指数は相転移のスケーリング則と同じ式を満たすと予想されることを学生にも伝えて、この分野への関心を高めさせたい。

この節では、学生でも考察可能なパーコレーション教材の可能性について検討する。

4.1 1次元パーコレーション

1次元の場合のサイトパーコレーションを、[10][11, 1.3節]をもとに考える。今、直線上に一定の間隔で点が配置されているとき、点を一定の確率 p ($0 \leq p \leq 1$) で占有する。このとき、隣り合う点が占有されている点の集合をクラスターといい、占有される点が無限に続くクラスターの存在について考える。

(1) 臨界確率 p_c :

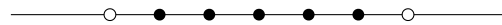
$p < 1$ のときは占有されない点が生じるので、無限に続くクラスターは存在しない。 $p = 1$ のとき、全ての点が占有されて無限に繋がる。したがって、臨界確率は $p_c = 1$ である。

以下では、 $p < 1$ のとき、すなわち $p < p_c$ のときを考える。占有される点の数が s 個のクラスターを s クラスターといい、 s をクラスターのサイズという。

(2) 点が s クラスターの左端である確率 $n_s(p)$:

ある点が s クラスターの左端であるのは、占有点が s 個連続し、クラスターの外側の点が占有されていないことである。したがって、その確率は $n_s(p) = p^s(1-p)^2$ である。

下図は5クラスターの場合で、黒丸は占有点、白丸は非占有点である。点が黒丸の左端である確率は $n_5(p) = p^5(1-p)^2$ である。



仮に、点の総数を L 個として L が十分に大きい場合を考えると、 s クラスターの数 $n_s(p)$ は $p^s(1-p)^2L$ と考えられるので、 $n_s(p)$ は点あたりの s クラスター数とみることでもできる。

(3) 点が s クラスターに含まれる確率 :

s クラスター内のどの点である確率も (2) と同じ確率であるので、点が s クラスターに含まれる確率は $sn_s(p)$ である。

(4) 選んだ点がどこかのクラスターに含まれる確率 :

任意に選んだ点が s クラスターに含まれる確率は $sn_s(p)$ であるので、どこかのクラスターに含まれる確率は $\sum_{s=1}^{\infty} sn_s(p)$ で表わされる。この和は点の占有確率 p と一致するので

$$\sum_{s=1}^{\infty} sn_s(p) = p \tag{4.1}$$

が成り立つ。この式は、左辺を実際に計算することでも導ける。実際、

$$\sum_{s=1}^{\infty} sp^s = p \sum_{s=1}^{\infty} p^{s-1} = p \sum_{s=1}^{\infty} (p^s)' = p \frac{d}{dp} \sum_{s=1}^{\infty} p^s = \frac{p}{(1-p)^2} \tag{4.2}$$

が成り立つことを利用すると、次の式が成り立つ。

$$\sum_{s=1}^{\infty} sn_s(p) = (1-p)^2 \sum_{s=1}^{\infty} sp^s = p$$

(5) 全クラスターの中で s クラスターの占める割合 (s クラスターの大きさ) $w_s(p)$:

任意に選んだ点が s クラスター内の点である確率は $sn_s(p)$ である. s クラスターの大きさを, 全クラスターの中で s クラスターが占める割合 $w_s(p)$ で定めると, $w_s(p)$ は次式で表わされる.

$$w_s(p) = \frac{sn_s(p)}{\sum_{s=1}^{\infty} sn_s(p)} = \frac{sn_s(p)}{p}$$

(6) クラスターの大きさの平均 $S(p)$:

s クラスターの大きさ $w_s(p)$ の平均 (期待値) を $S(p)$ とすると,

$$S(p) = \sum_{s=1}^{\infty} sw_s(p) = \frac{1}{p} \sum_{s=1}^{\infty} s^2 n_s(p)$$

である. $S(p)$ は, 式 (4.2) を利用すると次のように計算される.

$$\begin{aligned} S(p) &= \frac{(1-p)^2}{p} \sum_{s=1}^{\infty} s^2 p^s = (1-p)^2 \sum_{s=1}^{\infty} s^2 p^{s-1} \\ &= (1-p)^2 \sum_{s=1}^{\infty} \frac{d}{dp} (sp^s) = (1-p)^2 \left(\frac{d}{dp} \sum_{s=1}^{\infty} sp^s \right) \\ &= (1-p)^2 \frac{d}{dp} \left\{ \frac{p}{(1-p)^2} \right\} \\ &= \frac{p_c + p}{p_c - p} = \frac{1}{p_c - p} \{2 - (p_c - p)\} \quad (p_c = 1) \end{aligned}$$

となり, $S(p)$ は臨界確率 $p = p_c$ では発散する.

また, $2 - (p_c - p)$ は $p \uparrow p_c$ のとき緩慢変動関数なので, 臨界確率の近傍では

$$S(p) \propto (p_c - p)^{-1} \quad (4.3)$$

と表わせる. $S(p)$ は表 1 の $\chi(p)$ に相当する値であるので, 臨界指数は $\gamma = 1$ である.

(7) 相関関数 $G(r)$:

ある点から r 個の点だけ離れた点を距離 r の点とし, 占有されている点と距離 r だけ離れた点と同じクラスターに属する確率を $G(r)$ とする. この関数は相関関数と呼ばれる.

$$G(r) = p^r = e^{r \ln p} \quad (4.4)$$

1次元では同じ距離の点が両側にあることに注意すると, 相関関数 $G(r)$ の総和 $\sum_r G(r)$ は, 重複する $G(0) = 1$ を除いて次のように計算される.

$$\sum_r G(r) = 2 \sum_{r=0}^{\infty} G(r) - 1 = \frac{2}{1-p} - 1 = \frac{p_c + p}{p_c - p} = S(p)$$

したがって, 相関関数の総和は, クラスターの大きさの平均 $S(p)$ と一致する.

(8) 相関距離：

p が臨界確率に近いとき、 $\ln p$ を $p = p_c$ の回りでテイラー展開すると $\ln p \approx -(p_c - p)$ と近似できるので、式 (4.4) の指数部分は

$$r \ln p = -\frac{r}{\frac{1}{\ln p}} \approx -\frac{r}{\frac{1}{p_c - p}} \quad (4.5)$$

となる。右辺の分母を $\xi(p)$ とすると、

$$\xi(p) = -\frac{1}{\ln p} \approx \frac{1}{p_c - p} = (p_c - p)^{-1} \quad (4.6)$$

である。近似式を用いなくても、緩慢変動関数を用いると

$$\xi(p) = \frac{1}{p_c - p} L(p_c - p)$$

の形に表せるので、 $p \uparrow p_c$ のときは $\xi(p) \propto (p_c - p)^{-1}$ が得られ、 ξ は臨界確率で発散する。 ξ は相関距離とよばれる。式 (4.3) と見比べると、次のことも成り立つ。

$$S(p) \propto \xi(p) \quad (p \uparrow p_c) \quad (4.7)$$

また、相関距離 $\xi(p)$ を用いると、式 (4.4) の相関関数は

$$G(r) = e^{-\frac{r}{\xi}}$$

と表わされ、距離 r だけ離れた点が同じクラスターに属する確率は、指数関数的に減少する。 r が $\xi(p)$ よりかなり大きいと同じクラスターに属することはほとんどなく、 $\xi(p)$ より小さいとかなりの確率で同じクラスターに属する。たとえば、 $r = 5\xi(p)$ のときは $G(r) = e^{-5} \approx 0.0067$ 、 $r = \xi(p)$ のときは $G(r) = e^{-1} \approx 0.3678$ となる。相関距離は、点が繋がる確率が $1/e$ であるような距離とみることもできる。

この相関距離は表 1 の $\xi(p)$ に相当するものであるので、1次元の場合の臨界指数は $\nu = 1$ である。したがって $\gamma = \nu = 1$ であるが、この関係は一般論では必ずしも成り立たない。

以上、単純と思われる1次元のサイトパーコレーションについて、パーコレーションでの議論の元になる関数を幾つか紹介した。クラスターの大きさの平均、相関関数、相関距離などが定義でき、臨界確率の近くでは幾つかの関数がべき乗則に従い発散することも示された。確率ばかりではなく、無限等比級数、多項式の微分、そしてテイラー展開の知識も必要になる。設問を工夫すれば、それらの総合問題として学生に提示することも可能と思われる。

4.2 ベーテ格子におけるパーコレーション

1次元の場合は少し単純過ぎるので、[10][11, 1.4 節] をもとに別な例を紹介する。

(1) ベーテ格子の定義：

ベーテ格子は、もともとはポリマー研究において、多数の分子の結合過程を研究する中で考えられたモデルである。

ベータ格子は、最初に原点から z 本の枝を伸ばし、次々に $z-1$ 本の枝を伸ばす場合を考える。

簡単のため、以下では $z=3$ で考える。最初に、原点から 3 方向に枝を伸ばす。伸ばした 3 本の枝の端点から、互いに交差しないようさらに 2 方向に枝を伸ばす。この操作を限りなく続けて得られる格子がベータ格子である。

原点を第 0 世代として、 r 番目の格子点を第 r 世代とする。図 4 では第 3 世代までを図示した。ベータ格子は、次々に外側に広がるので内側に戻ってループを形成することはない。

ベータ格子の格子点の数は、第 R 世代は $3 \cdot 2^{R-1}$ 個であり、その世代までの総数は

$$1 + 3(1 + 2 + 4 + \dots + 2^{R-1}) = 3 \cdot 2^R - 2$$

である。世代数が増えると、総数との比は

$$\frac{3 \cdot 2^{R-1}}{3 \cdot 2^R - 2} \rightarrow \frac{1}{2} \quad (R \rightarrow \infty)$$

となる。枝が z 本の場合は $(z-2)/(z-1)$ に収束する。

以上で示した、ある世代の格子点の数とその世代までの総数との関係は、球の表面積と体積の関係と類似するものがある。一般に、球の体積の次数は空間次元と一致し、表面積と体積の次数は 1 だけ異なる。一般の d 次元球では、

$$(\text{表面積}) \propto (\text{体積})^{\frac{d-1}{d}} = (\text{体積})^{1-\frac{1}{d}}$$

である。ベータ格子では、世代数が十分に大きいと (第 R 世代) \propto (第 R 世代までの総数) という関係にあり、 d 次元球において $d \rightarrow \infty$ の場合に相当する。この意味で、ベータ格子の次元は無限次元という場合がある。

(2) 臨界確率：

ある格子点と 1 つの枝で結ばれる格子点を近接格子点という。ベータ格子では、どの格子点も 3 個の近接格子点をもつ。

ここで、ベータ格子に対して、原点は占有されているとして、その後の世代の格子点を確率 p で占有するサイトパーコレーションを考える。そして、原点から占有された近接格子点を次々に辿って無限に繋がる経路があるかどうかを考える。

枝の本数が 3 本で考えると、各格子点から新たに増える格子点は 2 個なので、各格子点からは新たに $2p$ 個の近接格子点が占有される。 $2p < 1$ のときは、世代が増えると占有される近接格子点が減少していくので、無限に繋がる経路ができる確率は 0 に近づく。したがって、無限に繋がるためには $2p > 1$ である必要があり、ベータ格子のサイトパーコレーションの臨界確率は

$$p_c = \frac{1}{2} \tag{4.8}$$

である。一般の z 本のときは、 $p_c = \frac{1}{z-1}$ である。

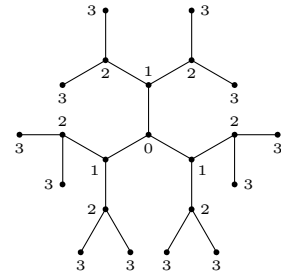


図 4: ベータ格子

(3) 無限に繋がる確率：

$p > p_c$ であったとしても、原点が無限に繋がるとは限らない。原点の近接格子点は確率 p で占有されるので、近接格子点がいずれも占有されない場合もある。その場合は、原点は無限に繋がることはない。そこで、「無限に繋がる」ということを原点に限定しないで、「任意に選んだ格子点が、その点から始まる枝を通して無限に繋がる」場合を考えることにする。その確率を $P(p)$ で表わす。

反対に、「任意に選んだ格子点が、その点から始まる枝を通して無限に繋がらない」確率も考え、それを $Q(p)$ とする。選んだ点が無限に繋がらない場合には、次の2つの場合がある。

- (i) 選んだ格子点が占有されていない場合。その場合の確率は $1 - p$ である。
- (ii) 選んだ格子点が占有されていても、その点から外側に伸びる2本の枝がいずれも無限に繋がらない場合。その場合の確率は $pQ(p)^2$ である。

最初の点も任意に選んだ格子点なので、その点から始まる枝が無限に繋がらない場合は、

$$Q(p) = 1 - p + pQ(p)^2$$

を満たす。これを $Q(p)$ に関する2次方程式として解くと、 $Q(p) = 1, \frac{1-p}{p}$ が得られる。

一方、任意に選んだ格子点から伸びるどの枝も無限には繋がらない確率は $Q(p)^3$ である。したがって、少なくとも1本の枝が無限に繋がる確率は $1 - Q(p)^3$ である。選んだ格子点が占有される確率は p であるので、その格子点が無限に繋がる確率は $p(1 - Q(p)^3)$ で表わされ、この確率は $P(p)$ と一致するはずなので、次式が成り立つ。

$$P(p) = p(1 - Q(p)^3)$$

これより、 $Q(p) = 1$ のときは $P(p) = 0$ である。これは、任意に選んだ格子点が無限に繋がることはないことを示し、 $p < p_c = \frac{1}{2}$ の場合に相当する。

一方、 $Q(p) = \frac{1-p}{p}$ のときは

$$P(p) = p \left\{ 1 - \left(\frac{1-p}{p} \right)^3 \right\} \quad (4.9)$$

となる。 $P(p) = 0$ となるのは $p = \frac{1}{2}$ の場合であり、 $P(p) > 0$ となるのは $p > p_c = \frac{1}{2}$ の場合である。図5は、式(4.9)のグラフである。

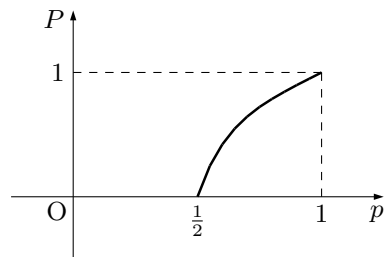


図5: 格子点が無限に繋がる確率

$p \approx p_c$ のときの状況は、 $P(p)$ を $p = p_c$ の回りでテイラー展開すると

$$P(p) = 6 \left(p - \frac{1}{2} \right) - 24 \left(p - \frac{1}{2} \right)^2 + \dots$$

となるので、 $p \approx p_c$ のときは

$$P(p) \approx 6(p - p_c) \propto (p - p_c)^1 \quad (p > p_c) \quad (4.10)$$

となる。臨界点の近くで無限に繋がる確率は1次式に比例するが、その直線の傾きは6と大きく急である。 $P(p)$ は表1の $\theta(p)$ に相当するので、臨界指数は $\beta = 1$ である。

なお、式(4.10)は、 $P(p)$ の展開式を

$$P(p) = 6(p - p_c)L(p - p_c)$$

と表すと、 $p \approx p_c$ のとき、 $L(p - p_c)$ は緩慢変動関数であることから導かれる。

(4) クラスターサイズの平均：

占有された格子点と枝で繋がっている占有格子点の集合をクラスターといい、占有格子点の総数をクラスターの大きさ(サイズ)という。ここでは、 $p < p_c$ のとき、つまり無限に繋がることはないときに、任意に選んだ格子点を含むクラスターのサイズの平均 $S(p)$ を求める。

最初に、任意に選んだ格子点から始まる一つの枝を考える。その枝の、近接格子点から伸びる部分枝に含まれる占有格子点の集合を考えると、平均すると占有格子点が $T(p)$ 個あるとする。このとき、考えている枝の近接格子点について、次の場合が考えられる。

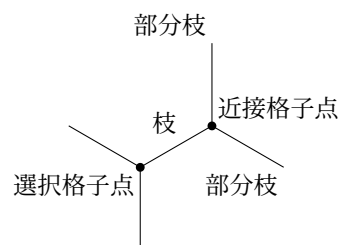


図6: 枝のクラスター

- (i) 近接格子点が占有されていない場合。それは確率 $1-p$ の場合であり、近接格子点から伸びる枝には繋がらないので、この枝のクラスターのサイズは0である。
- (ii) 近接格子点が占有されている場合。それは確率 p の場合であり、近接格子点は枝のクラスターサイズにカウントされる。その点から伸びる2本の部分枝のクラスターサイズの平均 $T(p)$ も含まれるので、このときの枝のクラスターサイズは $1 + 2T(p)$ で表わされる。

したがって、この枝に含まれる占有格子点の平均は、

$$T(p) = (1 - p) \cdot 0 + p \cdot (1 + 2T(p))$$

と表わされ、これから

$$T(p) = \frac{p}{1 - 2p}$$

が得られる。これは、 $p < \frac{1}{2}$ のときに成り立つ。

ここで、改めて任意に選んだ格子点が属するクラスターのサイズの平均 $S(p)$ を考える。選んだ格子点が占有されていないときは $S(p) = 0$ である。占有されているときのクラスターサイズは、選んだ格子点の他に、その点から伸びる3本の部分枝のクラスターサイズの平均 $T(p)$ も含まれるので、

$$\begin{aligned} S(p) &= 1 + 3T(p) = \frac{1 + p}{1 - 2p} = \frac{p_c + \frac{p}{2}}{p_c - p} \\ &= \frac{1}{2} \cdot \frac{1}{p_c - p} \{3p_c - (p_c - p)\} \quad (p < p_c) \end{aligned}$$

となる。したがって、 $p \approx p_c$ のときは

$$S(p) \propto (p_c - p)^{-1} \quad (p < p_c)$$

となり、 $p \uparrow p_c$ のとき $S(p)$ は発散する。 $S(p)$ は、表 1 の $\chi(p)$ に相当する値であるので、この場合の臨界指数は $\gamma = 1$ である。

以下、1次元と同様にして相関関数や相関距離を考えることもできる。ここで必要とされる知識は、基礎数学としての計算、等比級数の和、そして微分法のテイラー展開だけであり、複雑な計算は行われていない。確率としての考え方こそが重要である。

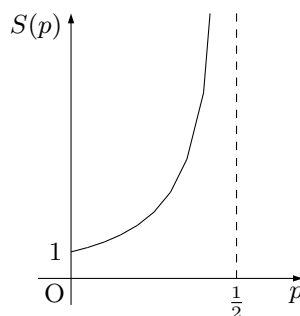


図 7: クラスターサイズの平均

5 おわりに

本稿では、相転移とパーコレーションの概要や、学生にも提示可能と思われるパーコレーションの教材例について紹介してきた。物質の性質が劇的に変化する相転移の臨界点の近傍では、いろいろな量がごとく臨界点との距離に関してべき乗則で変化し、しかも、そのべき指数は物質の違いを超えて共通の関係式を満たすと予想されることは驚くべき事である。同じ関係式が、相転移の数学モデルとされるパーコレーションでも予想されている。相転移は、物理学では重要課題として研究が進められている。数学でも、2006年・2010年・2022年には、この件に関する研究にフィールズ賞が与えられている。

この問題を学生に考えさせることは無理であっても、物理と数学の双方が関わる分野の重要課題として、相転移やパーコレーションの概要は紹介しておきたい。時間に余裕があるときは確率を含む総合問題として取り上げて、この問題に関する学生の関心を高めることが望まれる。

参考文献

- [1] H. E. スタンリー：相転移と臨界現象，東京図書，1974年
- [2] 西森秀稔：臨界現象の統計物理学，培風館，2005年
- [3] [URL] https://en.wikipedia.org/wiki/Universality_class
- [4] 田崎清明・原隆：相転移と臨界現象の数理，共立出版，2015年
- [5] 乙部巖己：パーコレーションシミュレーター 第2版
[URL] <http://argent.shinshu-u.ac.jp/math/index.html#Program>
- [6] 樋口保成：Percolation の臨界現象，数学 40，1988年
- [7] 田崎清明：Percolation の臨界現象と物理，数学 40，1988年
- [8] 坂井哲：パーコレーションの数理 2020，数学 74，2020年
- [9] 坂井哲：Hugo Duminil-Copin 氏の業績，数学 76，2024年
- [10] D. スタウファー・A. アハロニー：パーコレーションの基本原則，吉岡書店，2001年
- [11] Kim Christensen：Percolation Theory，2002
[URL] <https://web.mit.edu/ceder/publications/Percolation.pdf>